



TITLE:

理論II及び計算機室(<特集>東京大学物性研究所)

AUTHOR(S):

浅野; 花村; 小林

CITATION:

浅野 ...[et al]. 理論II及び計算機室(<特集>東京大学物性研究所). 物性研究 1971, 16(1): 28-31

ISSUE DATE:

1971-04-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/88231>

RIGHT:

かも意味の判る近似で解く方法は、一般に確立していません。従って $s-d$ の問題にも多体問題のあらゆる方法がもちこまれ、試みられています。近頃では Nozieres-de-Dominicis 理論や、functional integral の方法が調べられており、私たちも低温での free energy の計算に後者を試み、有限温度での議論の足がかりとしています。今までにはっきりしたこととして、低温、低磁場での変化が、 T^2 , H^2 に比例し normal である ($\log T$, $\log H$, \sqrt{T} などでない) ことは実験との比較の上で重要なことです。

$s-d$ 相互作用の問題は、つきつめれば、金属中の不純物に、いかにして磁気 moment が出現するかという、金属磁性に本質的な疑問を追求することになります。私たちの研究室では、これに関し、一方では Anderson Model に対する相互作用展開から糸ぐちを見出せないかと、最近では分配関数を Pfaffian で表示したり、あるいは functional integral と $N-D$ 近似を援用したり、苦心しています。さらにまた d -level の縮退を考慮することも必要と考え、spin のみならず軌道角運動量の消失を、 $s-d$ mixing による近藤効果としてとらえる考察を続けています。

私たちは現在総がかりで、稀薄合金の問題にとりくんでおりますが、最後にこれにたずさわる研究室の皆さんの声を収録して、報告を終りたいと思います。(原稿はここで終り、読者自ら試みよ、との注があります。)

(桜井)

理論Ⅱ及び計算機室

理論Ⅱの現在のメンバーは、山下次郎、花村栄一、小林謙二、浅野摂郎、難波裕子で、大学院には、楠正美、五木田正史、井上慎一、佐野尚武、浜崎正治が在籍中です。尚、計算機室にいる和光信也氏とも仕事の上で緊密な関係があります。山下、浅野は、主として遷移金属のバンド計算を行ってきました。和光も同様です。我々がこの10年内程に行なった計算の主なものは、和光、山下の強磁性 $Ni-Fe$ 、常磁性 Co の計算、浅野・山下の反強磁性 $Cr-r Mn$ の計算の他に、 $3d$, $4d$, $5d$ 遷移金属の非相対論的計算、 Au 等の相対論的計算の他、 $CoFe$, Ni_3Mn , $NiMn$, $TiFe$, $FeAl$ などいくつかの金属間化合物、

KCl, MgO, NiO, MnO, VO, TlCl, TlBr などのイオン結晶のバンド計算があります。最近井上はアルカリ金属 (Li ~ Cs) のフェルミ面の精密な計算を行ない、実験で観測されているフェルミ面の球からの微妙なずれもよく説明できることを示しました。さてこれらの計算の結果、遷移金属においても、一価のイオンと殆ど同じ周期的有効ポテンシャルの中を d 電子が動いているとするエネルギーバンドに基づく一体近似が、ある面では驚く程良く成立っているということがわかって来ました。現在最も直接的な実験的検証は、ド・ハース等によるフェルミ面の実験との比較でしょう。これは k 空間における $E(k)$ 曲線の等エネルギー面を実験と計算で比較することになります。その結果、3d, 5d 遷移金属及び 3d 遷移金属でも強磁性 Ni, Fe, 反強磁性 Cr 等実験でフェルミ面が観測されているものでは、計算から決められたものと驚く程よく一致しています。バンド計算から得られる波動関数もまた意味があるようです。例えばこれを使って Fe, Ni, Cr の磁気モーメントの空間分布を計算すると、これは中性子回折の実験結果をよく説明しますし、また Fe, Ni の内部磁場の大きさでも良い一致が得られています。

色々な構造の遷移金属の状態密度曲線を見ると、f. c. c. では Ni, Co が b. c. c. では Fe が強磁性になり易いこと、また b. c. c. - Cr のフェルミ面を調べると Cr が反強磁性になり易いことがよく理解出来ます。そこで系統的になされた 3d 遷移金属のバンド計算に基いてその磁氣的安定性を調べると、b. c. c. では Cr が反強磁性、Fe が強磁性、f. c. c. では、Mn, Fe は反強磁性、Co, Ni は強磁性がより安定で、一原子内で働く有効交換相互作用 (J_{eff}) を導入して分子場近似で計算すると、Cr から Ni まで、また強磁性か反強磁性かによらず、殆んど一定の J_{eff} (0.052 ~ 0.055 Ry) で観測される磁気モーメントの大きさを大体与えることが出来ます。Exchange splitting の大きさはまだ実験的に確定していませんが、現在まで観測されている範囲内では上記の値と consistent です。

合金の問題では、Ni の希薄合金の問題が難波によって取扱われ、不純物のまわりの磁気モーメントの分布は、バンドモデルによってほぼ定量的に説明出来ることが分っています。濃い合金については、C. P. A. による計算を始めていますが、かなり有望な方法のようです。

以上バンドモデルでうまく行った場合のみを列挙しました。しかし生の J_{eff} は 0.3 Ry 位ですから、これが $\frac{1}{6}$ 程度になるためには、電子同志が非常に強く correlate している (Herring の言う s 電子遮蔽も含めて) と考えざるを得ませんが、これらの効果は一体どこに消えたのでしょうか？時間的な変化が問題になる量ではこの影響が現われるのではないかと期待されます。キューリ点とか高温での帯磁率等の問題では、spin-fluctuation が重要だと思われませんが、光学的性質ではこの電子同志の強い相間の影響が出て来る場合があるのではないかと思います。この点、楠による“金属の螢光の理論”は将来一つの貴重な手掛りを与えるかも知れません。現在貴金属 (特に Cu) の光学的性質はバンドモデルによって非常に良く理解出来る (Ag の場合はプラズマの影響が見られる一楠の博士論文) ことが確かめられていますが、遷移金属では果して如何？非常に興味ある所です。また、電子相関の問題としては、遷移金属の酸化物の問題が非常に重要だと思われれます。これらの酸化物では、エネルギーバンドは果してどのような意味を持つのでしょうか？このような観点から遷移金属のバンド構造がもう一度問題になるかも知れません。

その他、山下は日本電機の中村と共に、電子格子相互作用による電流不安定性の問題を研究していますが、ここではそれに触れません。(以上 浅野)

最近の LASER 技術の進歩の結果、高密度の励起状態が結晶中に実現される様になった。forbidden gap, または Indirect gap を持つ半導体の Wannier 励起子は、励起子の寿命も長く、また有効ボーア半径も大きいため、簡単に、金属以上の有効電子濃度が得られる。低濃度の励起子ガス相、次の励起子分子相、更に次の濃度では、電子と正孔の質量比が 1 に比して小さい場合には、中間相 (電子に対しては高い有効濃度だが、正孔に対しては低い有効濃度)、高濃度では、電子も正孔も自由粒子として縮退した金属相が、次々に現れる。また濃密度励起子系の相は、体積一定のヘルムホルツ系であるので、各相転移濃度附近で、両相の共存状態が期待され、共存のあり方が、液滴を作るのか、または一様に共存するのか、面白い点である。以上の相図を濃度 (x 軸)、質量比 (y 軸) と温度 (z 軸) に対して、描いている。

次に、低濃度側では、励起子相や励起子分子相は、電子・正孔が空間的に強

い相関を持つ系であるが、この相に対しては、励起子（電子-正孔対）に Bose Operator を導入して dynamical 相互作用や Pauli 効果を非調和項（摂動）として繰り込み、各相の性質や、電場や光に対する応答を計算している。

金属・非金属転移が、半導体の中にモデルとして実現されるので、転移のプロセスを理論、実験両面から研究するのは、楽しみである。（以上 花村）

現在は、配向融解と格子の融解という観点から液晶の理論を展開しています。溶解の理論にも興味をもっております。ただ物性研のように部門の間の壁が厚い所では、私のようなものは少々異分子とならざるを得なくなります。また、物性研の標榜している「高度の研究」に私の研究は当てはまらないので時々自己反省するときがあります。（以上 小林）

理 論 Ⅲ

理論Ⅲ部門は教授中嶋貞雄氏、助教授鈴木増雄氏、助手黒田義浩氏・栗原康成氏、技官末包礼子氏、院生鈴木順三氏の6人から構成されています。現在鈴木増雄氏は海外出張中です。我々の研究室のメンバーは、中嶋貞雄氏を始めとして、それだけ興味が広いので色々な問題が研究室の話題として登場しますが現在の研究室のテーマは Liquid He^4 の pair-theory とその拡張にあります。即ち He^4 atom の間の effective な相互作用を引力として Liquid He^4 の状態の記述の出発点として超伝導状態と同様な pair-condensation（それが存在するものなら）を議論するわけです。多分近々ある程度の結論が出せると思います。また最近では Liquid 及び Solid He 中の electron bubble 及び excited He atom の問題にも関心を示しています。特に Solid He 中の electron bubble の mobility の問題が面白い問題を含んでいると思われます。三月には鈴木増雄氏も帰って来ますので spin 系の相転移や dynamics の問題にも研究室の話題が拡がりますので、研究室はますます賑やかになりそうです。

我々の研究室では構成メンバーのスタッフだけでなく、共同利用研の中の研究室にふさわしく、色々な大学のメンバーが出入りをして研究を進めて来まし